

УДК 621.43

А.А. Тропина, канд. физ.-мат. наук

ОБРАЗОВАНИЕ ОКСИДОВ АЗОТА ПРИ ДИФфуЗИОННОМ ГОРЕНИИ МЕТАНОВОЗДУШНОЙ СМЕСИ

Введение

Оксиды азота (NO) относятся к наиболее вредным примесям, поступающим в атмосферу при сжигании топлива в топках котлов и печей, двигателях внутреннего сгорания, газотурбинных установках. В последнее время в исследованиях, связанных с проблемой понижения эмиссии оксидов азота при горении, возрастает роль математического моделирования. Так как большинство реальных процессов горения происходит в турбулентном режиме, проблема сводится к расчету образования оксидов азота при турбулентном горении. В настоящей работе проводится оценка механизмов формирования NO в диффузионном турбулентном пламени. Разработанная методика расчета может быть адаптирована к исследованию механизмов образования оксидов азота в ДВС, работающих на природном газе.

Анализ последних достижений и публикаций

Известно, что процесс окисления азота практически не сказывается на протекании основных химических реакций горения и на аэродинамических характеристиках факела. Поэтому процесс расчета образования оксидов азота NO можно проводить в два этапа:

- 1) непосредственный численный расчет диффузионного турбулентного горения;
- 2) нахождение решения уравнения переноса для концентрации оксидов азота на основе полученных распределений температуры, концентраций реагирующих компонент и их пульсаций.

Основным вопросом при проведении подобного рода расчетов, по-прежнему, остается выбор адекватной модели турбулентности, модели, позволяю-

щей оценить скорость реакции в турбулентном потоке, и модели образования оксидов азота. Подробный анализ моделей турбулентности и методов расчета турбулентных течений с горением приведен в обзоре [1]. Что касается моделей образования оксидов азота в пламени, то к основным механизмам образования NO можно отнести [2]:

- а) тепловой механизм (схема Зельдовича);
- б) радикальный механизм (образование NO за счет так называемых быстрых реакций);
- в) механизм образования NO за счет азотосодержащих соединений в топливе.

Большинство расчетов образования оксидов азота проводится в рамках модели Зельдовича, когда образование NO связывается с протеканием трех основных реакций, а концентрация атомарного кислорода находится из условий равновесия. Более детальное рассмотрение кинетики химических реакций и подробный учет кинетической схемы приводит к значительному усложнению задачи. Так, в работе [3] рассмотрена цепочка из 196 прямых и обратных реакций, приводящих к образованию NO. Такое неоправданное усложнение задачи привело авторов к необходимости пренебрежения турбулентностью, т.е. рассматривалось ламинарное распространение пламени. Экспериментальные исследования, приведенные в монографии [4], показали, что поскольку реакция образования NO является реакцией с большим значением энергии активации, то наиболее сильное воздействие на эмиссию NO оказывают турбулентные пульсации температуры и концентраций реагирующих веществ.

В настоящей работе проводится анализ различных механизмов образования оксидов азота на при-

мере диффузионного горения метановоздушной смеси с учетом пульсаций температуры и концентраций и неравновесности реакции образования атомарного кислорода.

Цель и постановка задачи

Основная система уравнений, описывающая стационарное турбулентное горение, а также результаты расчетов процесса горения приведены в работе [5]. Использовалась $k - \varepsilon$ модель турбулентности в сочетании с подходом Шваба-Зельдовича. Для описания связи между турбулентностью и химической кинетикой использовалось предположение об обратной пропорциональности скорости химической реакции времени жизни турбулентного моля [6].

Рассматривается турбулентное диффузионное пламя, образующееся при смешении струи горючего (метана) и окислителя, которые вводятся в камеру сгорания в виде отдельных неперемешанных потоков [5]. Для определения эмиссии оксидов азота после решения системы уравнений, описывающих турбулентное диффузионное горение, дополнительно решалось транспортное уравнение для концентрации NO вида:

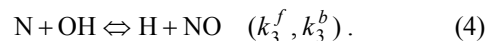
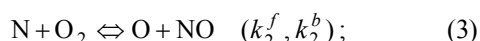
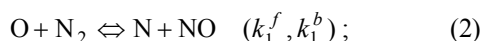
$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho u_j \frac{\partial c_{NO}}{\partial x_j} \right) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D \frac{\partial c_{NO}}{\partial x_j} \right) + W_{NO}, \quad (1)$$

где u_j ($j = 1, 3$) – компоненты вектора скорости,

c_{NO} – массовая концентрация оксидов азота,

$W_{NO} = M_{NO} \frac{dc_{NO}}{dt}$ – источниковый член, M_{NO} – молекулярный вес NO.

Замыкание этого уравнения зависит от выбора модели, описывающей образование оксидов азота в пламени. Согласно схеме Зельдовича, основные реакции, приводящие к образованию NO, имеют вид:



Здесь в скобках указаны константы прямых (с индексом “f”) и обратных (с индексом “b”) реакций. Все эти константы сильно зависят от температуры, а их конкретные значения были взяты из справочника [7]. Согласно схеме (2-4) скорость образования NO определяется следующим выражением:

$$\frac{dc_{NO}}{dt} = k_1^f c_O c_{N_2} + k_2^f c_N c_{O_2} + k_3^f c_N c - k_1^b c_{NO} c_N - k_2^b c_{NO} c_O - k_3^b c_{NO} c_H$$

Энергия активации реакции (2) очень велика, что делает ее лимитирующей в схеме Зельдовича. В тоже время, энергия активации для реакции окисления атомов N мала, поэтому, когда достаточно кислорода, достигается квазиравновесное состояние. В этом случае скорость образования оксидов азота определяется следующим выражением:

$$\frac{dc_{NO}}{dt} = k_1^f c_O c_{N_2} \cdot \frac{\left(1 - \frac{k_1^b k_2^b c_{NO}^2}{k_1^f c_{N_2} k_2^f c_{O_2}} \right)}{\left(1 + \frac{k_1^b c_{NO}}{k_2^f c_{O_2} + k_3^f c_{OH}} \right)}. \quad (5)$$

Для расчета источникового члена W_{NO} необходимо дополнительно определить концентрацию атомарного кислорода. В настоящей работе использовались два подхода:

- 1) расчет концентрации O из условий равновесия, т.е.

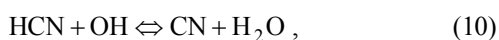
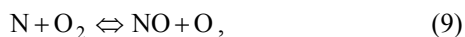
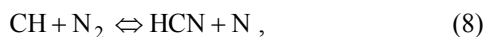
$$c_O = k_p \sqrt{c_{O_2}}, \quad (6)$$

где k_p – константа равновесия реакции образования атомарного кислорода [7];

- 2) расчет концентрации O путем дополнительного учета процессов диссоциации-рекомбинации (метод частичного равновесия), когда с учетом зависимости константы реакции от температуры получим следующее выражение:

$$c_O = 36.6 T^{1/2} \sqrt{c_{O_2}} e^{-227100 / RT}. \quad (7)$$

Для смесей, обогащенных топливом, существенным становится учет образования NO по так называемому быстрому механизму, определяемому следующей цепочкой реакций:



где основной является реакция (8).

Что касается механизма образования оксидов азота за счет азотосодержащих соединений в топливе, в данной работе он не рассматривается, поскольку вклад такого механизма становится существенным в случае горения жидких и твердых топлив.

Так как в работе рассматривается турбулентное диффузионное горение, то для определения концентрации NO в турбулентном потоке необходимо дополнительно учесть влияние турбулентности на кинетику образования NO. Для этого используется метод, основанный на плотности вероятности температуры и концентрации инертной примеси [4]. В этом случае скорость реакции образования оксидов азота в турбулентном потоке \tilde{W}_{NO} определяется следующим интегралом:

$$\tilde{W}_{\text{NO}} = \iint W_{\text{NO}} P(T, c) dT dc, \quad (13)$$

где W_{NO} находится с учетом соотношений (6-11), а $P(T, c)$ – плотность вероятности температуры и концентрации инертной примеси. Для процессов горения $P(T, c)$ представляется двухмоментной β -функцией [8]:

$$P(f) = \frac{f^{\alpha-1}(1-f)^{\beta-1}}{\int_0^1 f^{\alpha-1}(1-f)^{\beta-1} df}; \quad 0 \leq f \leq 1;$$

$$a = \tilde{f} \left(\frac{\tilde{f}(1-\tilde{f})}{\tilde{f}^{\alpha^2}} - 1 \right); \quad b = \frac{1-\tilde{f}}{\tilde{f}} a,$$

где $f = T, c$, \tilde{T}, \tilde{c} – средние значения температуры и концентрации, определяемые следующими интегра-

лами

$$\tilde{T} = \int_0^1 T \cdot P(T) dT; \quad \tilde{c} = \int_0^1 c \cdot P(c) dc.$$

Ковариация скалярной величины $\overline{f''^2}$ находится из решения соответствующего уравнения переноса при расчете процесса горения [8, 5].

На входе в камеру сгорания задавался следующий состав горючего и окислителя: 100% – CH_4 , 23% – O_2 , 77% – N_2 .

Результаты расчетов

Система уравнений, описывающих турбулентное диффузионное горение, решалась численно с использованием метода расщепления по пространственным переменным [9]. Конвективные члены аппроксимировались разностями, ориентированными против потока, второго порядка точности. Для улучшения сходимости применялся метод нижней релаксации.

Поскольку, после расчета процесса горения скорость потока \vec{v} является известной величиной, уравнение переноса (1) для концентрации оксидов азота является линейным, и его решение требует дополнительно не более 20 итераций. Варьировалась скорость истечения метана из круглого сопла: 15 м/с $\leq V_{\text{CH}_4} \leq$ 300 м/с; диаметр сопла: 2 мм $\leq d \leq$ 5 мм (рис.1). Дополнительно оценивалось влияние различных механизмов образования оксидов азота. Результаты расчетов сравнивались с результатами экспериментов, приведенными в монографии [10].

Было получено, что определяющим фактором, оказывающим сильное воздействие на образование NO, являются турбулентные пульсации температуры и концентрации. Учет влияния турбулентности на протекание реакции окисления сразу же приводит к резкому возрастанию концентрации NO, к тому же меняется местоположение и размер области, где формируется максимум концентрации NO (рис.1).

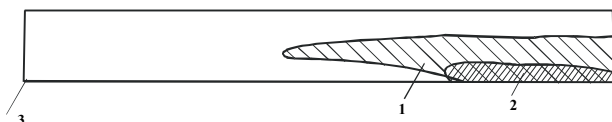


Рис.1. Области максимальных значений концентрации NO :

1 – при учете турбулентных пульсаций, 2 – при пренебрежении влиянием турбулентности. 3 – впуск метана

Учет неравновесности реакции образования атомарного кислорода (схема (7)) по сравнению с расчетом концентрации О из условия равновесия (схема (6)) приводит к возрастанию получаемой концентрации NO. Распределение концентрации оксидов азота при различных механизмах их формирования приведено на рис.2. Видно, что основной вклад в образование оксидов азота вносит тепловой механизм с учетом неравновесности реакции образования атомарного кислорода. С увеличением скорости метана на входе в камеру, когда общий выход NO падает, возрастает роль быстрого механизма образования оксидов азота (8-11), его вклад становится соизмеримым с образованием NO по тепловому механизму.

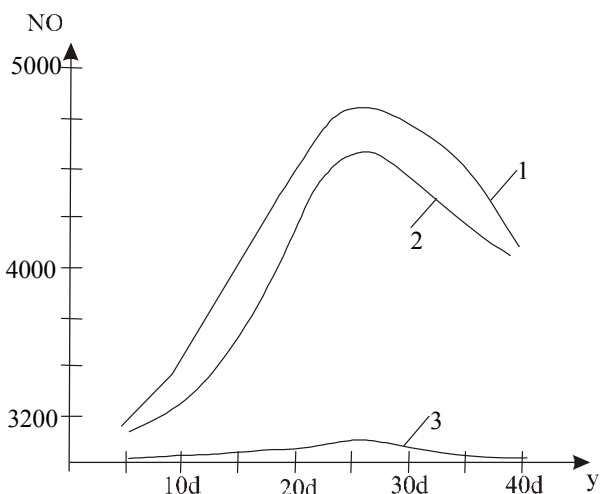


Рис.2. Профили концентрации NO (млн^{-1}) в сечении $x=250d$:

1 – тепловой неравновесный механизм, 2 – тепловой равновесный механизм, 3 – быстрый механизм

Все дальнейшие расчеты были проведены с учетом как теплового, так и быстрого механизмов формирования оксидов азота.

Варьирование скорости метана на входе в камеру оказывает существенное влияние на все характеристики процесса горения. Так, увеличение скорости метана на входе до значения $V_{\text{CH}_4}=150$ м/с приводит к расширению сечения формирующегося факела (он занимает практически всю камеру (рис.3), при дальнейшем росте V_{CH_4} факел сужается, максимумы температур перемещаются ближе к соплу.

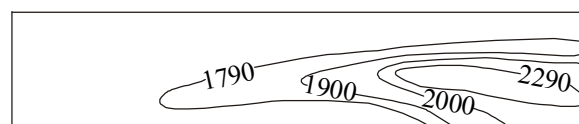


Рис.3. Профили температур при скорости метана на входе 150 м/с

При этом зависимость максимальной температуры в пламени от скорости метана на входе в камеру носит немонотонный характер (рис.4). При изменении V_{CH_4} от 50 м/с до 80 м/с максимальная температура в пламени практически не изменяется, достигая величины $2288-2300^{\circ}\text{K}$, понижаясь при увеличении и уменьшении скорости подачи метана в камеру.

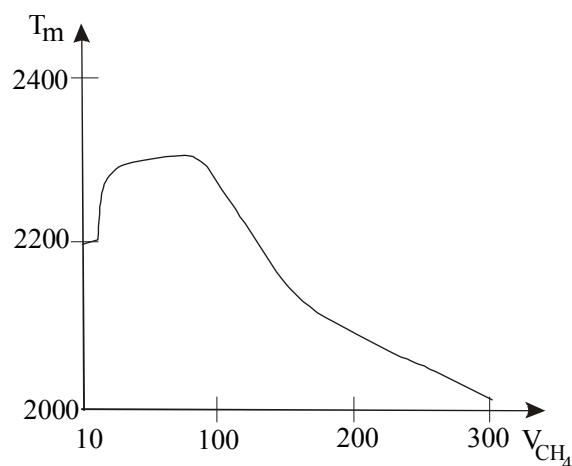


Рис.4. Зависимость максимальной температуры в пламени от скорости подачи метана

Максимум концентрации NO достигается на выходе из камеры, а по мере роста скорости метана на входе он смещается к устью сопла, параллельно происходит сужение области, где достигается мак-

симальная температура.

На рис.5, 6 приведены профили массовой концентрации оксидов азота в различных сечениях по оси камеры (при диаметре сопла $d=5$ мм, $V_{CH_4}=50$ м/с, $V_{CH_4}=100$ м/с). Нумерация сечений на рис.5, 6 совпадает.

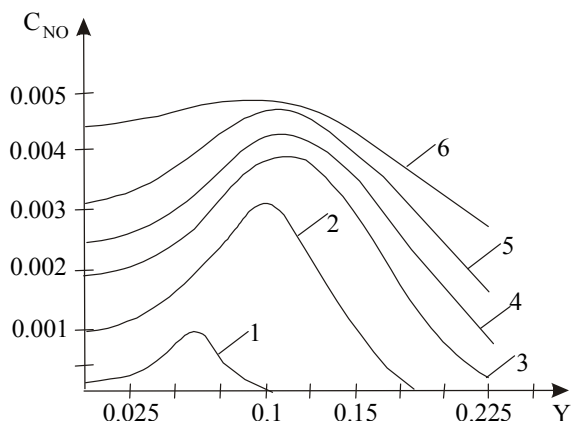


Рис.5. Распределение концентрации NO в различных сечениях вдоль оси камеры ($V_{CH_4}=50$ м/с): 1 – $x=100d$; 2 – $x=140d$; 3 – $x=180d$; 4 – $x=240d$; 5 – $x=320d$; 6 – $x=360d$

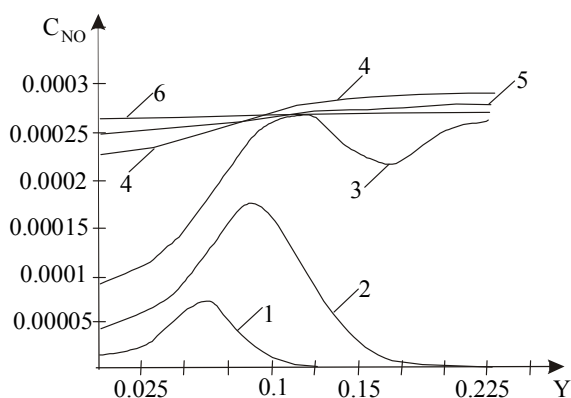


Рис.6. Распределение массовой концентрации NO в различных сечениях по оси камеры ($V_{CH_4}=100$ м/с)

Из рисунков видно, что максимум концентрации оксида азота достигается на расстоянии от оси факела равном $20d$ в сечении, соответствующему выходному сечению. По мере движения к соплу (при уменьшении $\frac{x}{d}$) максимумы NO падают и перемещаются ближе к оси факела. С ростом скорости метана на входе в камеру концентрация оксидов азота в сечениях, примыкающих к выходному, практически

постоянна поперек канала, а максимум NO достигается в сечении $x=180d$.

Если оценивать средний коэффициент избытка воздуха α по расходу метана и окислителя на входе в камеру, то зависимость средней по объему концентрации NO от параметра α достигает максимума при $\alpha=1,23$, падая как при увеличении, так и при уменьшении α .

Такое поведение обусловлено влиянием двух конкурирующих факторов:

1) увеличением содержания атомарного кислорода с уменьшением V_{CH_4} (рост α);

2) увеличением гомогенности смеси с ростом V_{CH_4} (снижение α).

Фактически вся область может быть поделена на зоны с различной концентрацией компонент, т.е. смесь является негомогенной, и уровень концентрации NO оказывается выше там, где более высокий уровень температуры.

Рост скорости метана на входе в камеру, помимо увеличения содержания CH_4 , способствует более интенсивному перемешиванию и завихренности, поскольку число Рейнольдса $Re = \frac{\rho_{CH_4} v_{CH_4} d}{\mu_{CH_4}}$ увеличивается, что приводит к увеличению гомогенности смеси и к снижению выхода NO.

Если построить зависимости безразмерных комплексов $\frac{T}{T_{max}}$, $\frac{c_{NO}}{c_{NO}^{max}}$ от расстояния вдоль оси канала, то, начиная с $V_{CH_4}=70$ м/с, вид этих кривых не меняется при изменении скорости метана на входе. Это говорит о том, что начиная с $Re=5020$, решение выходит на автомодельное.

Качественное поведение решения и количественные характеристики расчетов удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными по горению газообразного топлива в так называемых инжекционных горелках с подобной геометрией [10].

Выводы

Анализ полученного решения позволяет утверждать следующее:

1) при расчетах образования оксидов азота необходимо учитывать изменение скорости химической реакции в турбулентном потоке за счет пульсаций температуры и концентраций компонент смеси;

2) основным механизмом образования оксидов азота является тепловой механизм, однако при рассмотрении горения топливо-обогащенных смесей при низких температурах эмиссия NO по быстрому механизму начинает вносить значительный вклад в общий выход NO;

3) негомогенность смеси и рост концентрации атомарного кислорода по сравнению с равновесной являются основными причинами, вызывающими увеличение выхода NO;

4) предложенная методика образования оксидов азота показала удовлетворительное качественное и количественное согласование с экспериментальными данными.

Работа проведена в рамках гранта МОН Украины 0103V001439 “Теоретические основы моделирования турбулентных течений газовых смесей с химическими и фазовыми превращениями”.

Список литературы:

1. Tieszen S.R. On the fluid mechanics of fires// *Ann. Rev. Fluid Mech.* 2001. V.33. P.67-92.
2. Зельдович Я.Б., Баренблатт Г.И., Либрович В.Б. и др. *Математическая теория горения и взрыва*. М., 1980. 370 с.
3. Бочков М.В., Ловачев Л.А., Хвисевич С.Н. и др. *Образование оксида азота при распространении ламинарного пламени по гомогенной метановоздушной смеси*// *Физика горения и взрыва*. 1998. Т34. №1. С.9-19.
4. Кузнецов В.Р., Сабельников В.А. *Турбулентность и горение*. М., 1986. 287с.
5. Тропина А.А. *Моделирование турбулентного горения метановоздушной смеси*// *Автомобильный транспорт*. Харьков, 2003. С.245-249.
6. Gran I., Magnussen B.F. *A numerical study of a bluff-body stabilized diffusion flame. 2. Influence of combustion modeling and finite rate chemistry*// *Combust. Sci. Technology*. 1996. V.119. P.191-217.
7. Кондратьев В.Н. *Константы скорости газофазных реакций*. Л., 1970. 351 с.
8. Методы расчета турбулентных течений/Под ред. М. Хонькина. М., 1984. 463 с.
9. Марчук Г.И. *Методы расщепления*. М., 1988. 264 с.
10. Иссерлин А.С. *Основы сжигания газового топлива*. Л., 1987. 336 с.

УДК 621.43.052

А.П. Марченко, д-р техн. наук, В.А. Петросянц, канд. техн. наук, Д.Е. Самойленко, асп.

ВЛИЯНИЕ РЕГУЛИРОВАНИЯ ТУРБОКОМПРЕССОРА С БЕЗЛОПАТОЧНЫМ НАПРАВЛЯЮЩИМ АППАРАТОМ НА ПОКАЗАТЕЛИ ДИЗЕЛЯ 4ЧН12/14

Введение

Работа транспортного двигателя характеризуется большим количеством переходных и долевых режимов работы. При этом, у ДВС со свободным тур-

бокомпрессором характеристики поршневого двигателя и лопаточных машин согласованы в узком диапазоне расчетных режимов (например номинальной мощности либо крутящего момента), доля которых в